
TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: N2612 – Elektrotechnika a informatika
Studijní obor: 3906T001 – Mechatronika

Preprocesor pro kombinované modely

Preprocessor for combined models

Diplomová práce

Autor:	Bc. Petr Vilčínský
Vedoucí práce:	Ing. Otto Severýn, Ph.D.
Konzultant:	Ing. David Tondr

V Liberci 12.5.2008

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou diplomovou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé DP a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé diplomové práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom toho, že užít své diplomové práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Diplomovou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím diplomové práce a konzultantem.

Datum:

Podpis:

Poděkování

V první řadě bych rád poděkoval vedoucímu mé diplomové práce panu Ing. Ottovi Severýnovi, Ph.D. za jeho odbornou pomoc, cenné rady a poskytnuté informace.

Dále děkuji svým rodičům za jejich materiální a duševní podporu, bez které by tato práce nemohla vzniknout.

Abstrakt

Tématem diplomové práce je vytvoření programu generujícího multidimenzionální strukturované puklinové sítě a další vstupní soubory pro program Flow123D a vytvoření grafického uživatelského rozhraní tohoto generátoru.

Práce se skládá ze tří částí. První část se zabývá problematikou puklinového proudění v podzemí a metodice diskrétních puklinových sítí a jejich generování. Následující kapitola obsahuje popis programu Flow123D. Ve třetí části je popsáno prostředí generátoru, který byl v rámci této práce vytvořen. Dále jsou zde uvedeny informace o vstupním souboru generátoru, použitých datových strukturách a ukázky sítí, které program generuje.

Vytvořený program, vstupní soubory a výsledky testovacích úloh lze nalézt na přiloženém CD.

Abstract

The aim of this Diploma Thesis is to create a program for generating multidimensional structured fracture networks and other output files for program Flow123D and to create graphical user interface for generator.

Diploma Thesis consists of three parts. First part contains introduction to underground fracture networks and explains problems creating fracture networks, there is also description of algorithms for generating triangular meshes. In second part is description of program Flow123D. Third part of the Thesis describes interface of created generator, format of its input file, used data structures and also contains examples of meshes by generator.

Created program, input files and results from testing tasks are included on enclosed CD.

Obsah

Obsah	6
Seznam obrázků	7
Úvod	8
1 Sítě	9
1.1 Pukliny	9
1.2 Algoritmy diskretizace.....	13
1.2.1 Voronoiho diagram.....	13
1.2.2 Delaunayho triangulace	14
1.2.3 Advancing Front.....	14
2 Program Flow123D	16
2.1 Vlastnosti Flow123D	16
2.2 Tvorba sítí.....	16
3 Preprocesor pro kombinované modely	19
3.1 Popis programu	19
3.2 Ukázky generovaných sítí.....	23
3.3 Grafické rozhraní.....	24
3.4 Výkonná část (generátor)	26
3.5 Popis algoritmu generování.....	26
3.6 Použité datové struktury (výstupní formáty)	27
3.6.1 Soubor .msh	27
3.6.2 Soubor .mtr	28
3.6.3 Soubor .bcd	29
3.7 Vstupní soubor	29
3.7.1 Proměnné v Mesh Size	30
3.7.2 Generator	31
3.7.3 Boundary Conditions.....	33
3.7.4 Output	34
3.8 Ukázky výstupů za použití generátoru a Flow123D	35
3.8.1 Okrajové podmínky na uzlech.....	35
3.8.2 Okrajové podmínky na stěnách	37
4 Závěr	39
Literatura	40

Seznam obrázků

Obr. 1-1 Regularita.....	10
Obr. 1-2 Dvě protnuté pukliny	11
Obr. 1-3 Ignorovaná průsečnice.....	11
Obr. 1-4 Nekompatibilní trojúhelníková síť	12
Obr. 1-5 Kompatibilní trojúhelníková síť	12
Obr. 1-6 Voronoiho diagram.....	13
Obr. 1-7 Delaunayho triangulace a Voronoiho diagram.....	14
Obr. 1-8 Advancing Front	15
Obr. 1-9 Advancing Front metoda u prostorového tělesa	15
Obr. 2-1 Kompatibilní a nekompatibilní propojení elementů různé dimenze	16
Obr. 2-2 Pukliny generované programem – GSSAM	17
Obr. 2-3 Síť generovaná programem – GSSAM	18
Obr. 3-1 2D pohled na body sítě	20
Obr. 3-2 3D pohled na body sítě vyplněné tetrahedrony	20
Obr. 3-3 Hlavní typy rovin.....	21
Obr. 3-4 Pootočené typy rovin	21
Obr. 3-5 Buňka složená z tetrahedronů.....	22
Obr. 3-6 Rozložená buňka z tetrahedronů	22
Obr. 3-7 Šestina buňky z různých pohledů	22
Obr. 3-8 Puklinová síť bez tetrahedronů.....	23
Obr. 3-9 Puklinová síť s tetrahedrony.....	24
Obr. 3-10 Přímá úprava vstupního souboru	25
Obr. 3-11 Formulářová úprava vstupního souboru.....	25
Obr. 3-12 Mesh Size hodnoty v grafickém prostředí.....	30
Obr. 3-13 Proměnné v Mesh Size	30
Obr. 3-14 Oblast pro zadávání hodnoty pro generátor.....	31
Obr. 3-15 Pukliny typu X.....	31
Obr. 3-16 Pukliny typu XY1	32
Obr. 3-17 Pukliny typu XY2	32
Obr. 3-18 Oblast okrajových podmínek v grafickém prostředí	33
Obr. 3-19 Definice okrajových podmínek	34
Obr. 3-20 Oblast pro zadávání výstupních parametrů	34
Obr. 3-21 Puklinová síť (OKP uzly)	36
Obr. 3-22 Model proudění v puklinové síti (OKP uzly)	36
Obr. 3-23 Jiný pohled na model (OKP uzly)	37
Obr. 3-24 Puklinová síť (OKP stěny)	37
Obr. 3-25 Model proudění v puklinové síti (OKP stěny)	38
Obr. 3-26 Jiný pohled na model (OKP stěny).....	38

Úvod

Modelování hydrogeologických procesů je obor získávající na významu. V současné době je stále častěji možné slyšet o problematice s uskladněním vyhořelého jaderného paliva a jiných nebezpečných odpadů v podzemí. Provádí se výběr vhodných lokalit pro taková úložiště. Modelování v tomto procesu hraje dominantní roli. Další možné využití numerického modelování podzemního proudění je např. při těžbě ropy nebo pro průzkum zdrojů pitné vody. Přitom jsou používány metody založené na diskretizaci dané oblasti. Tato diskretizace vychází z geologického modelu dané oblasti. Proto jsou v daných oblastech prováděna měření, při kterých se používá geologických vrtů a geofyziky. Ze vzorků jader vrtů a z naměřených dat se poté pomocí generátorů sítí určí přibližná podoba puklinové sítě v oblasti. Pro testování nových řešících algoritmů v programu Flow123D jsou takto generované sítě příliš rozsáhlé a nelze na nich jednoduše určitý algoritmus otestovat. Tento problém řeší právě generátor puklinových sítí vytvořený v této diplomové práci. Generátor vytváří strukturované kombinované sítě, které by měly usnadnit a především urychlil testování nově vznikajících algoritmů pro program Flow123D.

Práce je členěna do tří kapitol. V první kapitole je popsána problematika tvorby puklinových sítí. Následující kapitola obsahuje informace o programu Flow123D a současný přístup k tvorbě puklinových sítí. Třetí část práce se zabývá popisem rozhraní generátoru, popisem vstupních dat a ukázkami výstupů.

1 Sítě

Podzemní proudění se dělí na dva hlavní typy. Porézní, které představuje proudění v sedimentech jako je např. pískovec a puklinové proudění, které je následkem vytvoření puklin ve vyvřelinách jako např. žula.

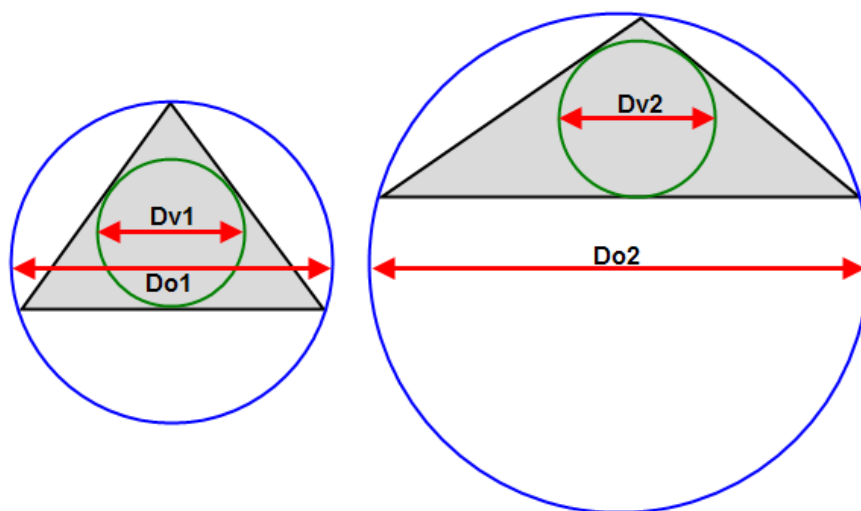
Při modelování proudění u puklin se používají určitá zjednodušení. Např. je možné nahradit pukliny porézním médiem. Tento přístup je vhodný při velkém počtu malých puklin, které se chovají podobně jako porézní médium. Problém ale nastane, když jsou v oblasti velké pukliny, které vlastnosti porézního média nemají. Jiné možné řešení je pomocí diskretizovaných puklinových sítí, ty bohužel naráží na jiný problém a tím je množství puklin, které zvyšuje celkovou složitost sítě. Jako nejlepší řešení se nabízí kombinace těchto dvou přístupů – kombinovaný model. Malé pukliny nahradit porézním médiem a ponechat pouze ty větší. Tento přístup je použit i u generátoru vytvořeného v této práci.

1.1 Pukliny

Puklina vznikne narušením zemské kůry například tektonickou činností. Pukliny a jejich sítě vznikající v horninách jsou tvarově velmi komplikované útvary, které je pro další zpracování na počítači potřeba zjednodušit. Jednou z možností zjednodušení je nahradit pukliny rovinnými kruhovými útvary nebo rovinnými mnohoúhelníky. Toto zjednodušení lze provést i z toho důvodu, že není reálně možné zjistit přesnou podobu pukliny. Podoba puklinové sítě se totiž rekonstruuje z naměřených dat, která se získávají z hlubinných vrtů v oblastech, kde je prováděn výzkum. Při těchto vrtech se zjištěné údaje vloží do počítače a program na základě údajů vygeneruje puklinovou síť. Do generátoru jsou proto zaneseny jen ty nejvýznamnější pukliny, kterým se říká deterministické, protože jsou založené na reálných datech. Zbylé pukliny se vygenerují stochastickým procesem na základě statistických charakteristik naměřených dat.

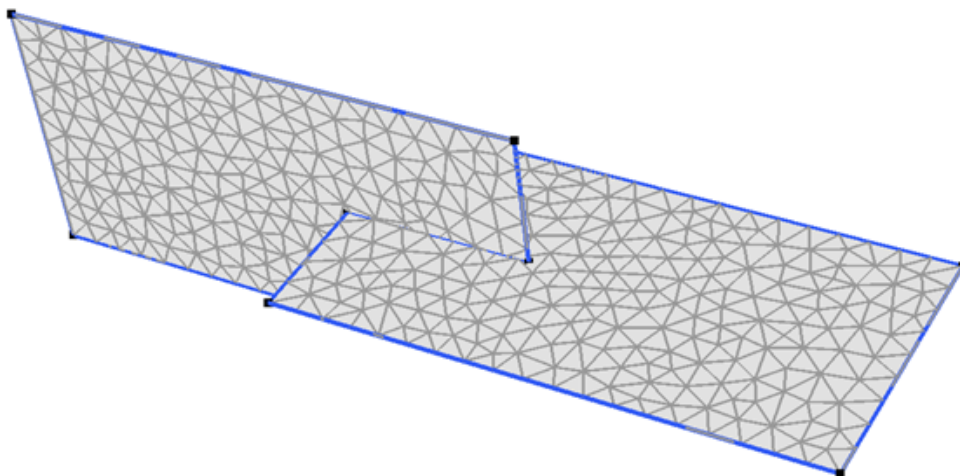
Pro zjednodušení se puklina bere jako plochý element umístěný v prostoru a její tloušťka se promítne do hodnot fyzikálních veličin puklině přiřazených, např. propustnosti. Pukliny se navzájem v prostoru protínají a vytváří tzv. puklinovou síť.

Aby se na puklinové síti mohly simulovat fyzikální děje, například proudění tekutiny, pomocí numerických metod, musí se oblast – v našem případě puklinová síť – rozdělit na podoblasti – hovoříme o diskretizační síti. Pokud tyto oblasti mají tvar trojúhelníků, potom se tomuto procesu říká triangulace. Při vytváření trojúhelníkové sítě je posuzována její kvalita. Ta je posuzována z hlediska úhlů ve vytvářených trojúhelnících. Aby byla síť kvalitní, je potřeba, aby měla dobrou regularitu. Tu je možné poznat např. pomocí poměru průměrů vepsaných a opsaných kružnic, jak je zobrazeno na Obr. 1-1. Na obrázku vlevo je vidět trojúhelník, vhodnější pro numerické výpočty. Špatná regularita trojúhelníkové sítě totiž snižuje podmíněnost matice diskretizované úlohy a tím zneprůstňuje výsledky. Proto se snažíme, aby výsledné trojúhelníky byly co nejvíce rovnostranné. Ústav NTI má k dispozici generátor puklinových sítí, ten má ale problémy právě s regularitou, proto jsou hledány i jiné způsoby, jak diskretizační síť generovat. Jedna z možností je např. použití programu GMSH. Tento program má ale problémy s respektováním průsečnic vzniklých protnutím puklin a proto není vhodný (viz předešlá bakalářská práce [4]).



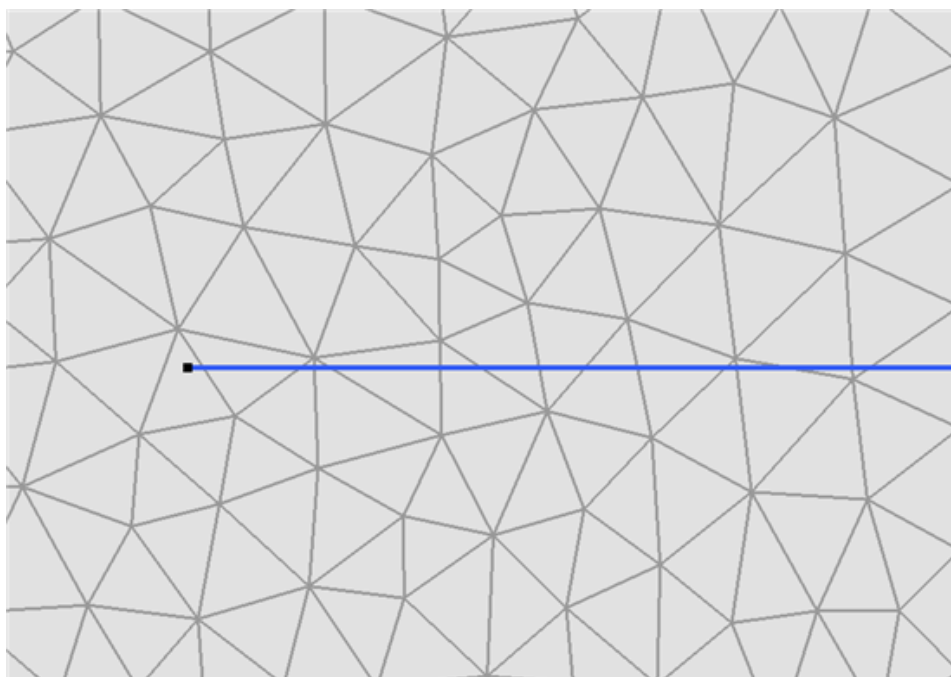
Obr. 1-1 Regularita

Obr. 1-2 zachycuje dvě protnuté pukliny, které svým průnikem tvoří průsečnici.



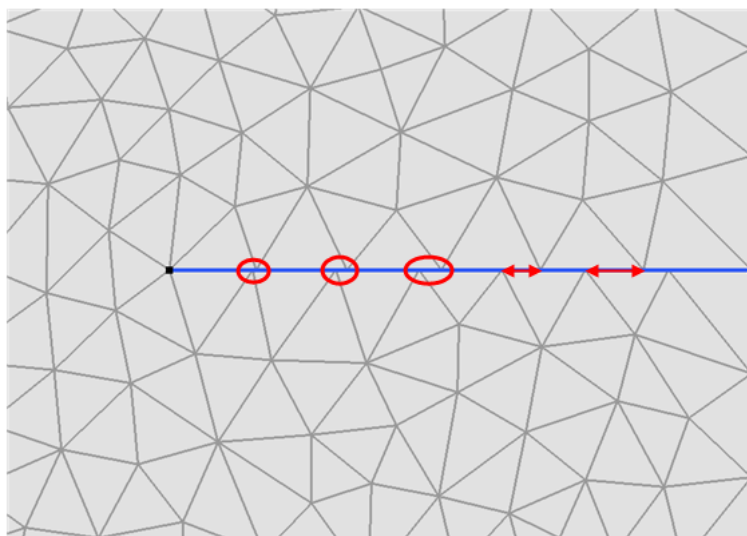
Obr. 1-2 Dvě protnuté pukliny

Aby bylo možné na vytvořené síti provést výpočty, je u většiny metod nutné, aby výsledná síť respektovala průsečnice puklin. To znamená, aby například nevznikla situace, jako na Obr. 1-3. Na obrázku je vidět síť jedné pukliny (pohled z boku na Obr. 1-2), kde jednotlivé strany trojúhelníků prochází skrze průsečnici (nekompatibilní síť). I tento typ sítě lze numerickými metodami řešit, ale k tomu je potřeba přizpůsobit samotný řešící algoritmus.



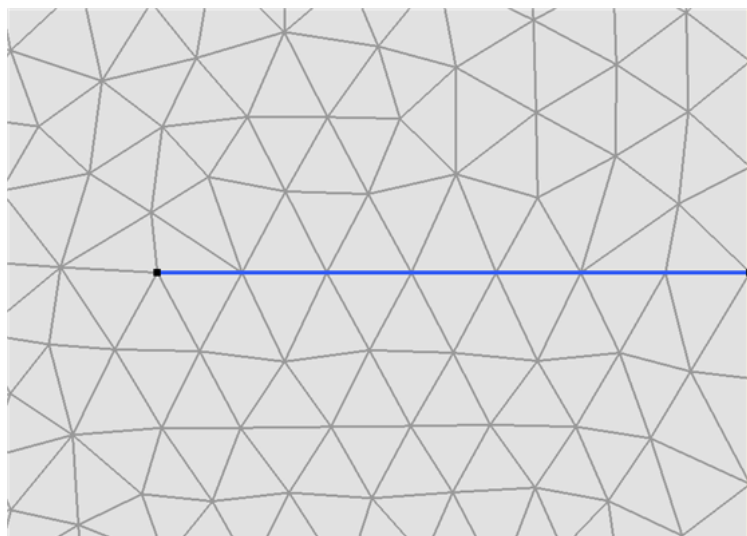
Obr. 1-3 Ignorovaná průsečnice

Při diskretizaci je také důležité, aby „pomocný“ bod (bod, který může být vytvořen např. proto, aby byl trojúhelník co nejvíce rovnostranný), který vytvoříme na průsečnici, ve výsledku figuroval u obou puklin. Pokud by tomu tak nebylo, pak by nám řešící program zahlásil chybu sousednosti. Příklad, jak výsledná diskretizace nesmí vypadat je vidět na Obr. 1-4. Je na něm patrné, že jednotlivé strany trojúhelníků u průsečnice na sebe nenavazují. Podobné problémy by se vyskytly i u druhé navazující pukliny, která by s první puklinou sousedila.



Obr. 1-4 Nekompatibilní trojúhelníková síť

Je tedy potřeba vysítovat puklinu podobně, jako je to zobrazeno na Obr. 1-5, kde spolu jednotlivé strany trojúhelníků sousedí.



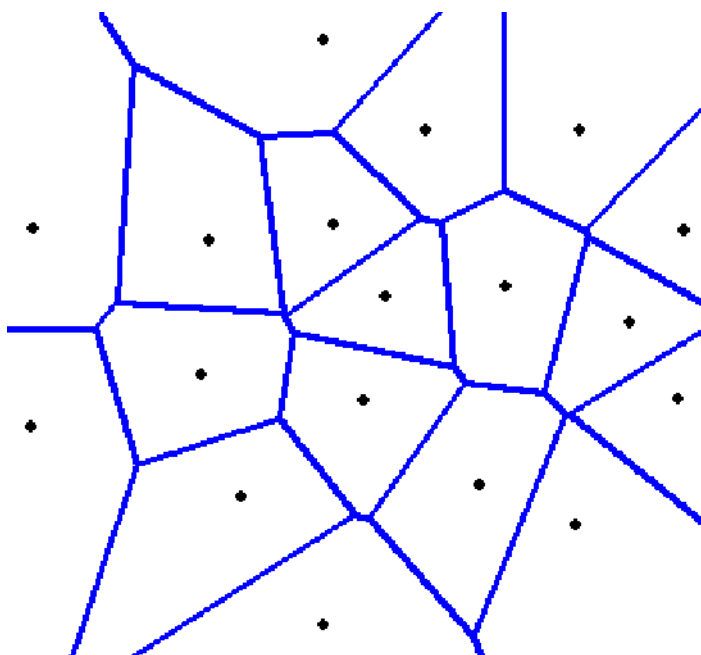
Obr. 1-5 Kompatibilní trojúhelníková síť

1.2 Algoritmy diskretizace

Pro generování trojúhelníkových sítí se nejčastěji používají algoritmy, které jsou zmíněny v této kapitole. Níže popisované algoritmy jsou určeny pro „čistě“ 2D oblasti, pro puklinové sítě nefungují (nelze u nich definovat průsečnice).

1.2.1 Voronoiho diagram

Diagramy nesou jméno po ukrajinském matematikovi Georgy Voronoy (Voronoi). Další používané názvy pro algoritmus jsou *Voronoi tessellation* (mozaika), *Voronoi decomposition* (rozklad) nebo *Dirichlet tessellation* (podle Lejeune Dirichleta). Jedná se o algoritmus, který se používá k rozdělení prostoru na oblasti, jejichž velikost je určena vzájemnou vzdáleností jednotlivých bodů v prostoru. Tento algoritmus je dále využíván *Delaunayho triangulací*, která je popsána v kapitole 1.2.2. Příklad diagramu je na Obr. 1-6.



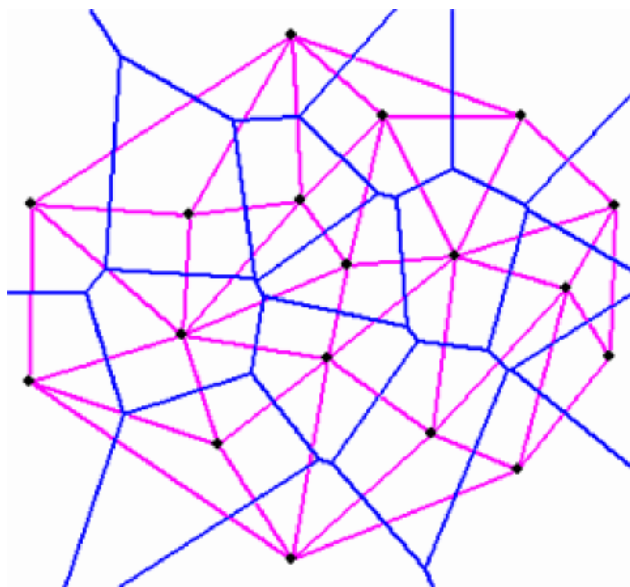
Obr. 1-6 Voronoiho diagram

Algoritmus funguje na principu půlení spojnic. Mezi každými dvěma body si lze představit spojnicí, ke které je právě v půlce vytvořena kolmice. Části těchto kolmic poté tvoří Voronoiho diagram.

1.2.2 Delaunayho triangulace

Jedná se o algoritmus, jehož výsledkem je trojúhelníková síť. Dochází u něho k vytvoření trojúhelníků z definovaných bodů. Trojúhelníky jsou tvořeny tak, že uvnitř kruhu, který je opsán libovolnému trojúhelníku vytvořenému z definovaných bodů, neleží žádný z definovaných bodů. V praxi to znamená, že máme libovolnou množinu bodů, ze kterých chceme vytvořit trojúhelníkovou síť.

Tento algoritmus nám říká, jak dosáhnout kvalitní trojúhelníkové sítě, která bude obsahovat malý počet trojúhelníků s ostrými úhly, které zlepšují výpočty u puklinových sítí. *Delaunayho triangulace* využívá *Voronoiho algoritmus*, který je popsán v kapitole 2.1. Pokud totiž máme pro definované body vytvořenu *Voronoiho mozaiku*, tak poté výslednou síť vytvoříme tak, že propojíme body, které spolu sousedí, tj. ty, které mají společnou hranici. Ukázka, jak vytvořená trojúhelníková síť *Delaunayho triangulací* (fialová barva) spolu s *Voronoiho mozaikou* (modrá barva) vypadá, je na Obr. 1-7.

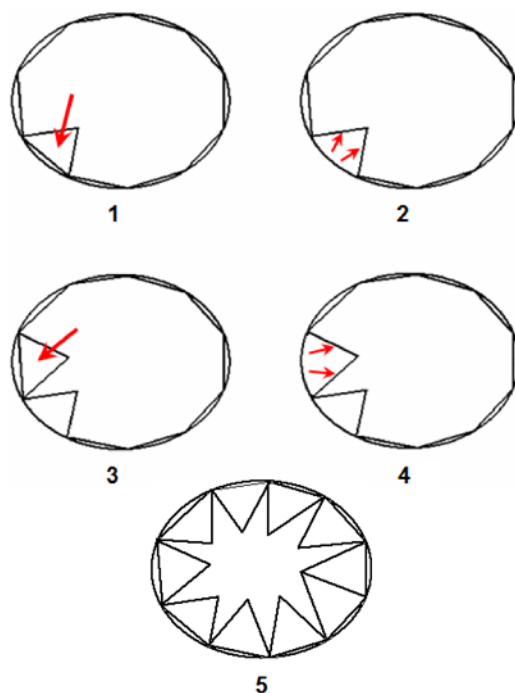


Obr. 1-7 Delaunayho triangulace a Voronoiho diagram

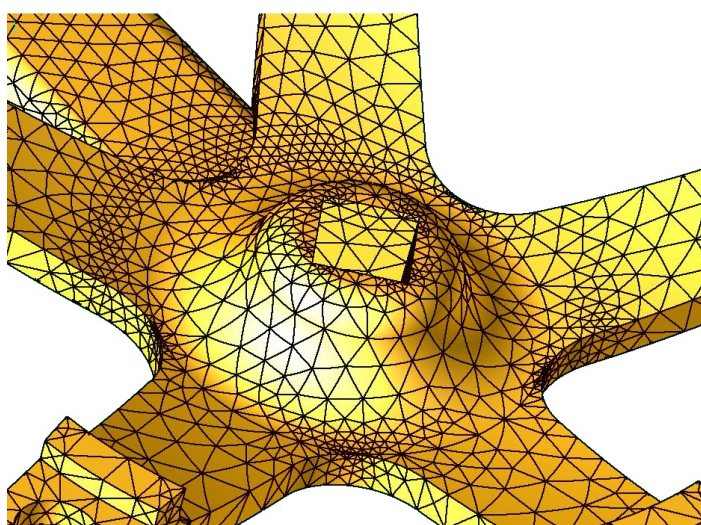
1.2.3 Advancing Front

Algoritmus, který je využíván ke generování trojúhelníkové sítě. U *Advancing Front* metody jsou trojúhelníky postupně generovány od hranice oblasti. Pokud je vytvořen nový trojúhelník, je z oblasti odečten a ohraničení oblasti se posune. Proto

nese metoda anglický název *Advancing Front* (postupující „hrana“). Algoritmus postupně zaplňuje oblast, až je celá pokryta trojúhelníky. Ukázka je vidět na Obr. 1-8, kde na prvním obrázku je přidán element, na druhém posunuta hranice, na třetím vložen další element a na čtvrtém opět posunuta hranice. Podoba sítě po vysítování celé okrajové hranice je vidět nad číslem 5. Tento algoritmus lze také použít pro sítování prostorových oblastí (Obr. 1-9) [9].



Obr. 1-8 Advancing Front



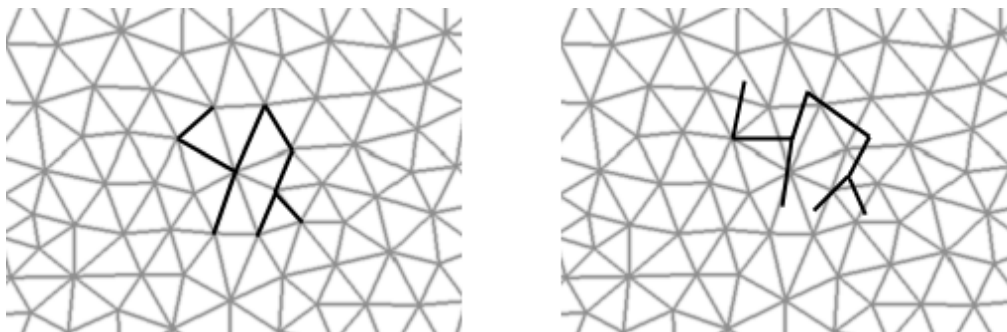
Obr. 1-9 Advancing Front metoda u prostorového tělesa

2 Program Flow123D

2.1 Vlastnosti Flow123D

Program Flow123D vyvíjený ústavem NTI je počítačovou implementací matematického modelu podzemního proudění. Podporuje kombinované modely, tzn. modely, jejichž síť obsahují prvky různých dimenzí (1D, 2D i 3D elementy – multidimenzionalita). Je ho tedy možné použít např. pro výpočty proudění v puklinových sítích s porézním médiem.

Flow123D obsahuje některé algoritmy, které umí pracovat s tzv. *kompatibilními* a *nekompatibilními* propojeními elementů. Jedná se o vzájemné propojení elementů, kdy u kompatibilního propojení na sebe jednotlivé elementy navazují. To u nekompatibilního propojení není a tím se zjednodušuje tvorba puklinových sítí. Různé druhy elementů lze generovat nezávisle a ty ve finále spojit v jednu síť. Těmto podmínkám je pak potřeba také přizpůsobit i řešící algoritmus. Příklad kompatibilního a nekompatibilního propojení zobrazuje Obr. 2-1.

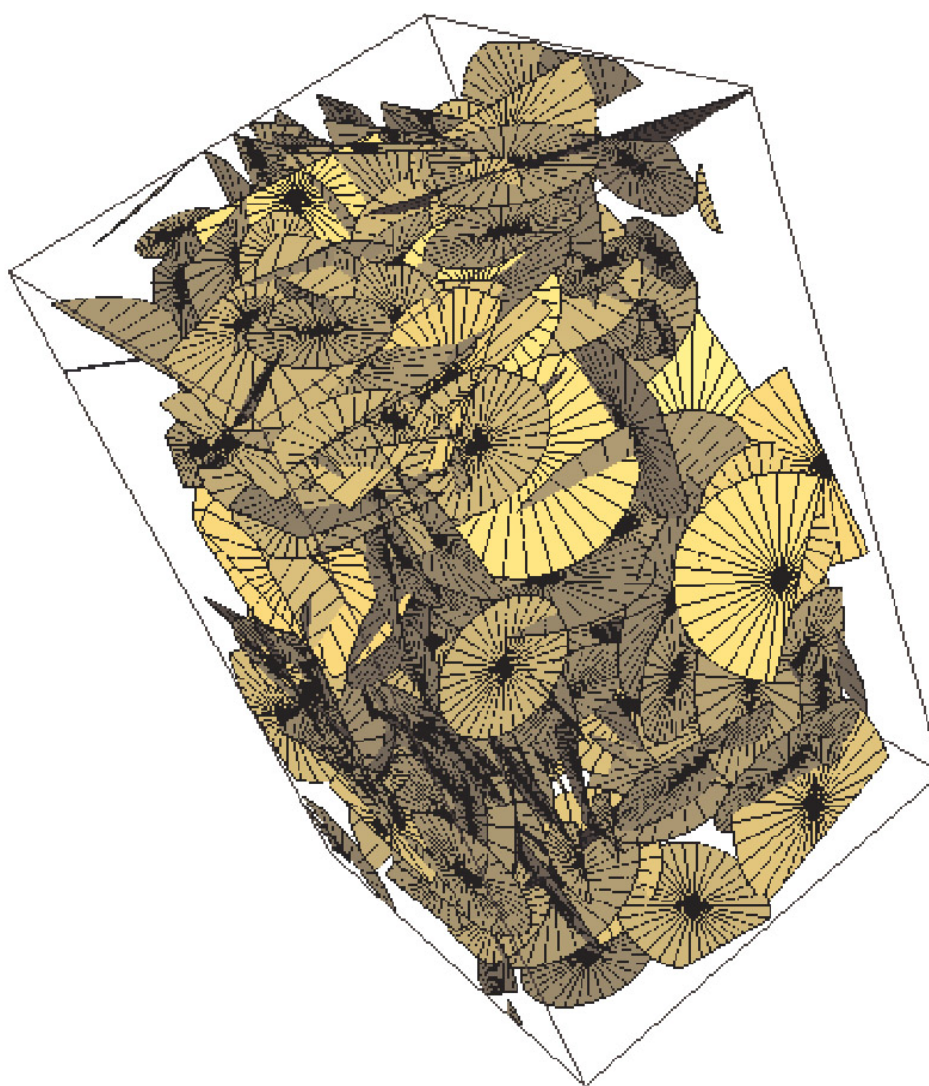


Obr. 2-1 Kompatibilní a nekompatibilní propojení elementů různé dimenze

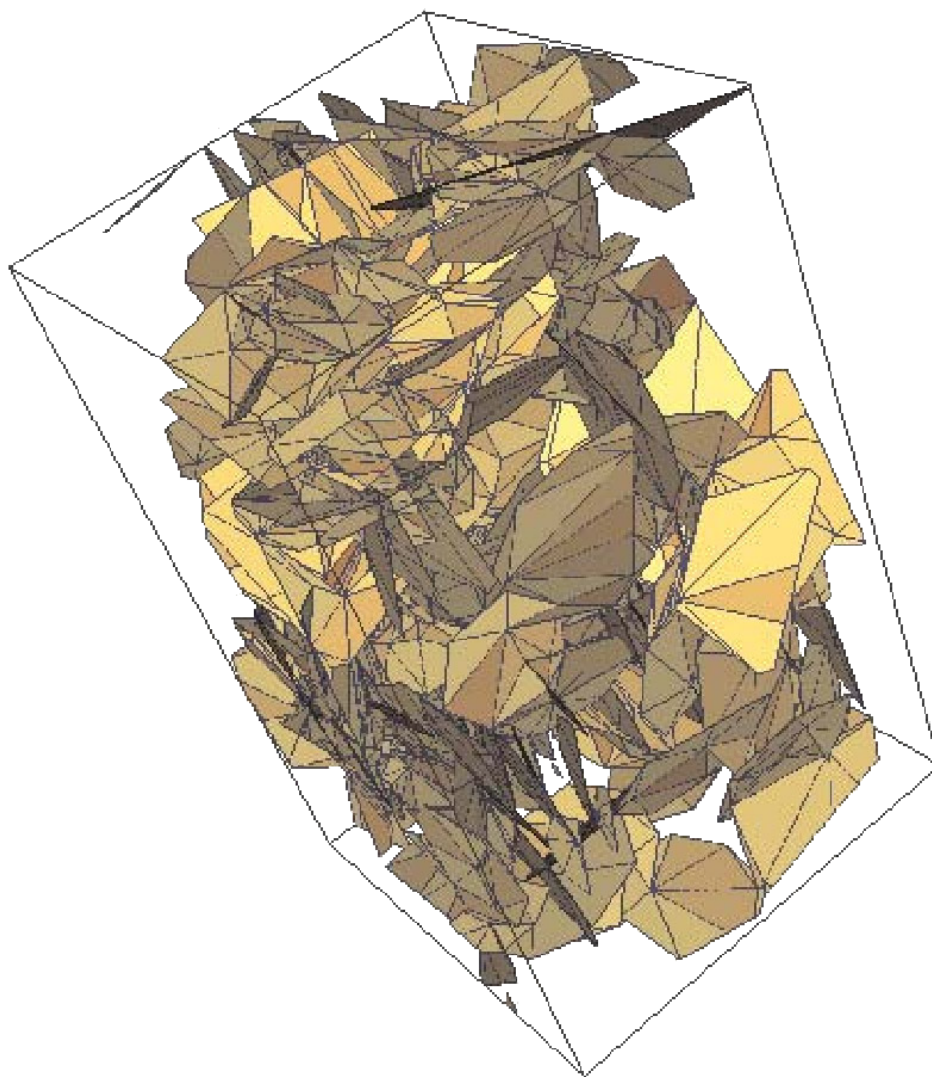
2.2 Tvorba sítí

Bohužel je technicky nemožné zcela a podrobně zmapovat skutečně existující puklinovou síť v určité lokalitě. Proto se vytváří programy, které jsou schopné na základě provedených měření v lokalitě (měření proudění, tlaků, karotáže, výzkum jader, geofyzika...) a jejich vyhodnocení vytvořit přibližný model puklinové sítě, který má shodné statistické rozložení puklin, jejich orientaci a jejich vlastnosti jako skutečná síť.

V současné době se na ústavu NTI generují puklinové sítě pomocí programu, který vytvořil Ing. Martin Vohralík, Ph.D. (Generátor sítí puklin, GSSAM) – [3]. Program generuje pukliny kruhového tvaru (Obr. 2-2) podle zadaných kritérií, které poté vysítuje (Obr. 2-3). Nevýhodou tohoto řešení jsou složité sítě a jejich nízká regularita. Takové sítě jsou nevhodné pro generování středně velkých testovacích sítí pro nové řešící algoritmy programu *Flow123D* a i jejich použití pro reálné výpočty je nesnadné. Tento problém řeší generátor sítí popsáný v této diplomové práci, který vytváří strukturované sítě, které jsou vhodné pro testování modelů a dají se použít i v reálných úlohách.



Obr. 2-2 Pukliny generované programem – GSSAM



Obr. 2-3 Sít' generovaná programem – GSSAM

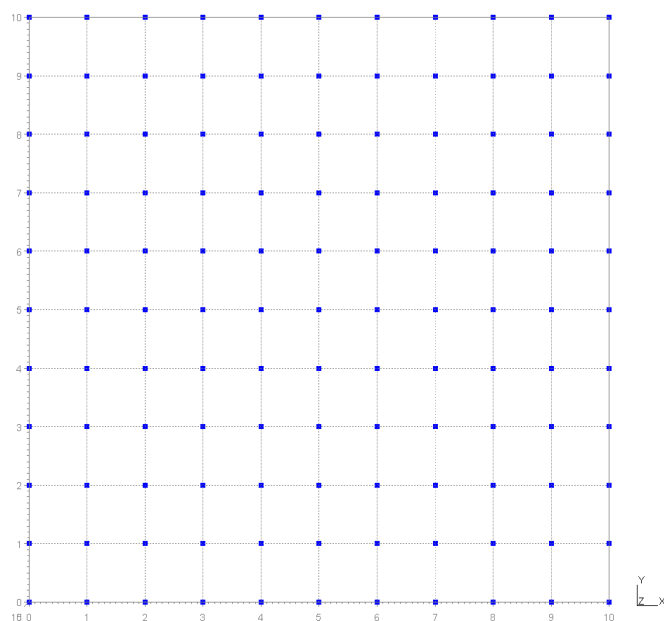
3 Preprocesor pro kombinované modely

3.1 Popis programu

Jedná se o program vytvořený v rámci této diplomové práce, který je alternativou k předešlému generátoru vytvořenému Martinem Vohralíkem. Program (preprocesor, generátor) se skládá ze dvou částí. První část je výkonná. Ta podle vstupního souboru vytvořeného např. grafickým prostředím (druhá část), vytvoří požadovanou strukturovanou puklinovou síť, soubor s okrajovými podmínkami a soubor s definicí materiálů pro jednotlivé pukliny. Druhá část je již zmíněné grafické prostředí, ve kterém uživatel jednoduchým způsobem zadá vstupní parametry a program vytvoří vstupní soubor pro druhou část.

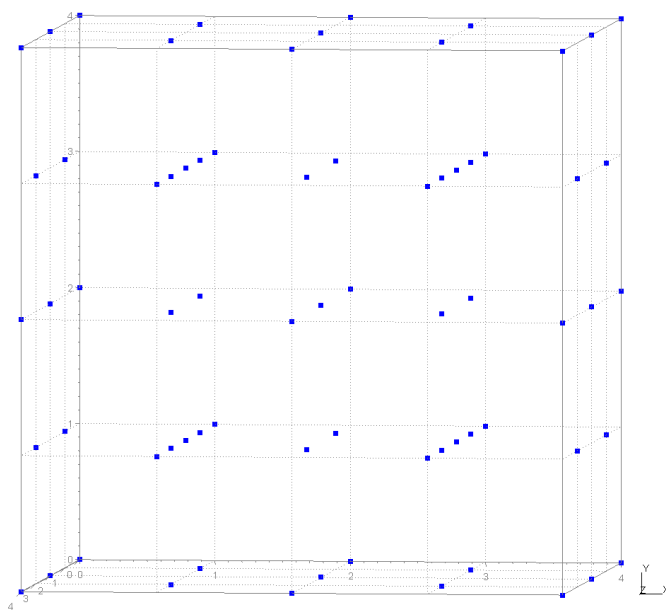
Program vytváří strukturované puklinové sítě v devíti rovinách, které mohou být doplněny 3D elementy představujícími porézní médium. Program vychází z následujících vstupních dat. Do programu je možné zadat velikost oblasti, pro kterou bude strukturovanou puklinovou síť generovat. Dále je potřeba definovat počet puklin pro každý typ, případně zadat, zda se má celá oblast vyplnit tetrahedrony (porézní médium). Případně je možné zadat okrajové podmínky a doplňující parametry výstupu. Všechny tyto parametry jsou podrobně vysvětleny v kapitole 3.7, která se zabývá popisem vstupního souboru pro generátor.

Generátor vytváří souřadnice jednotlivých puklin a bodů v síti pouze v oblasti celých čísel. Na Obr. 3-1 je vidět 2D pohled na síť bodů, ze kterých je vytvářena výsledná podoba puklinové sítě. Je na něm patrné, že všechny body mají celočíselné souřadnice. Právě toto použití celočíselných souřadnic bodů napomáhá k jednoduššímu generování kompatibilních sítí.



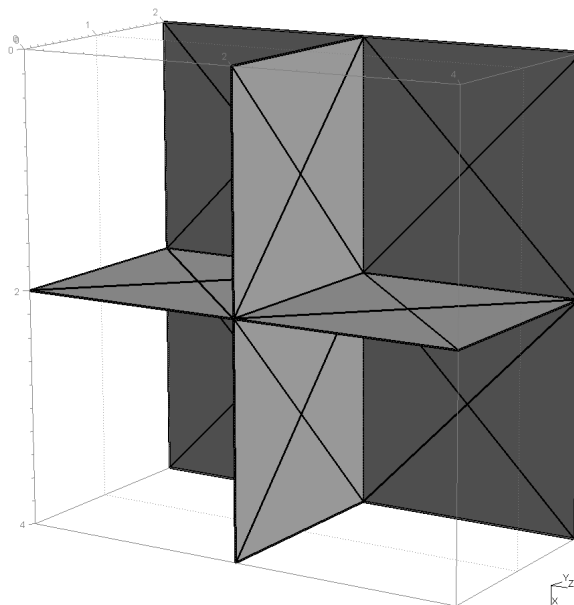
Obr. 3-1 2D pohled na body sítě

U Obr. 3-2 je již vidět 3D pohled na body, které jsou použité při generování sítě s tetrahedrony. Aby bylo možné zachovat kompatibilní spojení při generování puklin právě v devíti rovinách s použitím pouze celých čísel pro souřadnice bodů, bylo potřeba použít jako rozměr pro nejmenší buňku právě číslo 2. Proto mají výsledné sítě dvojnásobnou velikost, než jsou zadané vstupní parametry o rozměrech oblasti (podkapitola 3.7.1).



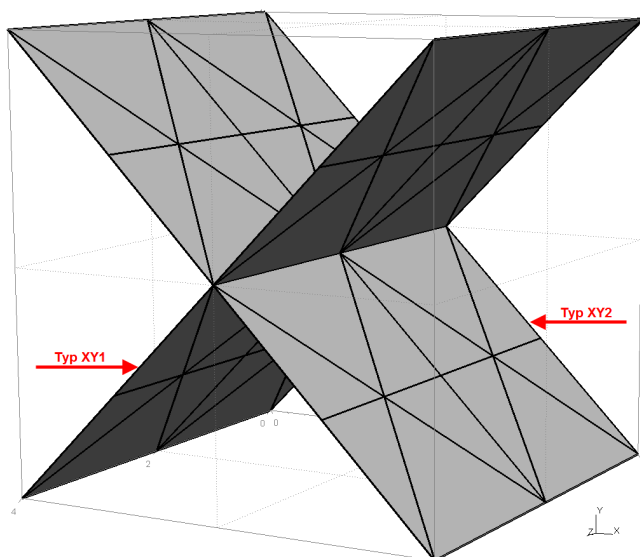
Obr. 3-2 3D pohled na body sítě vyplněné tetrahedrony

Jak již bylo řečeno, program generuje strukturované puklinové sítě v devíti rovinách. Na Obr. 3-3 jsou vidět hlavní 3 typy rovin, ve kterých jsou pukliny generovány.



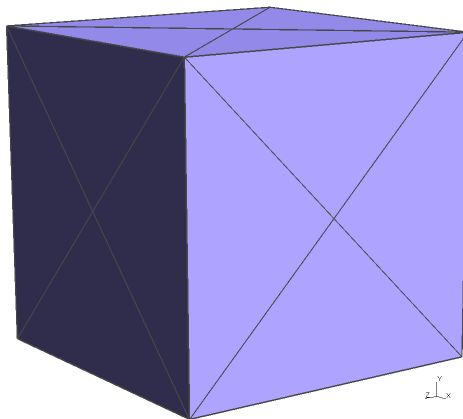
Obr. 3-3 Hlavní typy rovin

Na Obr. 3-4 jsou vidět další dva typy pukliny, které jsou otočené o 45° vůči puklinám ležícím v rovině YZ. Zbylé 4 typy jsou stejné, s tím rozdílem, že jsou pootočené vůči rovinám XY a XZ.

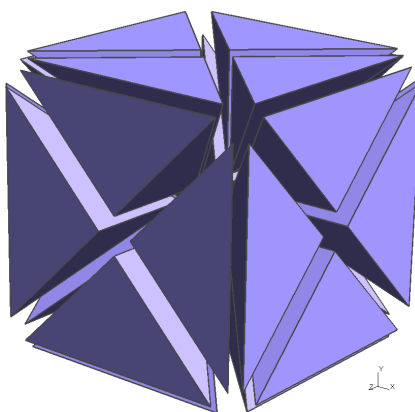


Obr. 3-4 Pootočené typy rovin

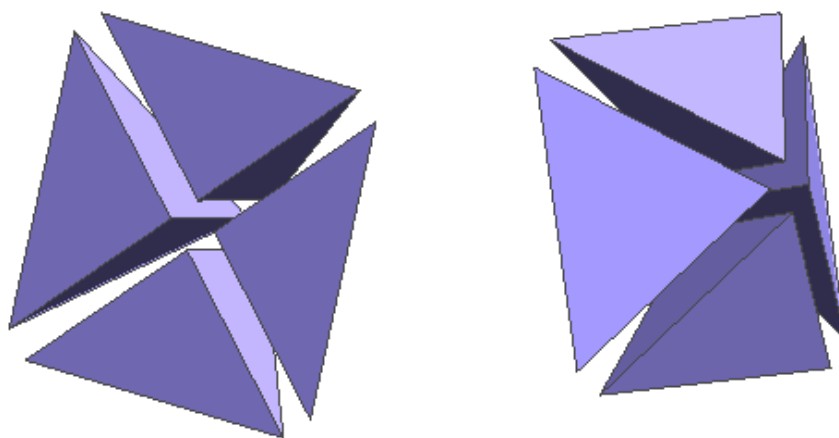
Obrázky Obr. 3-5, Obr. 3-6 a Obr. 3-7 zobrazují podrobnější strukturu základního stavebního prvku (buňky) složeného z 24 tetrahedronů, nahrazující porézní médium.



Obr. 3-5 Buňka složená z tetrahedronů



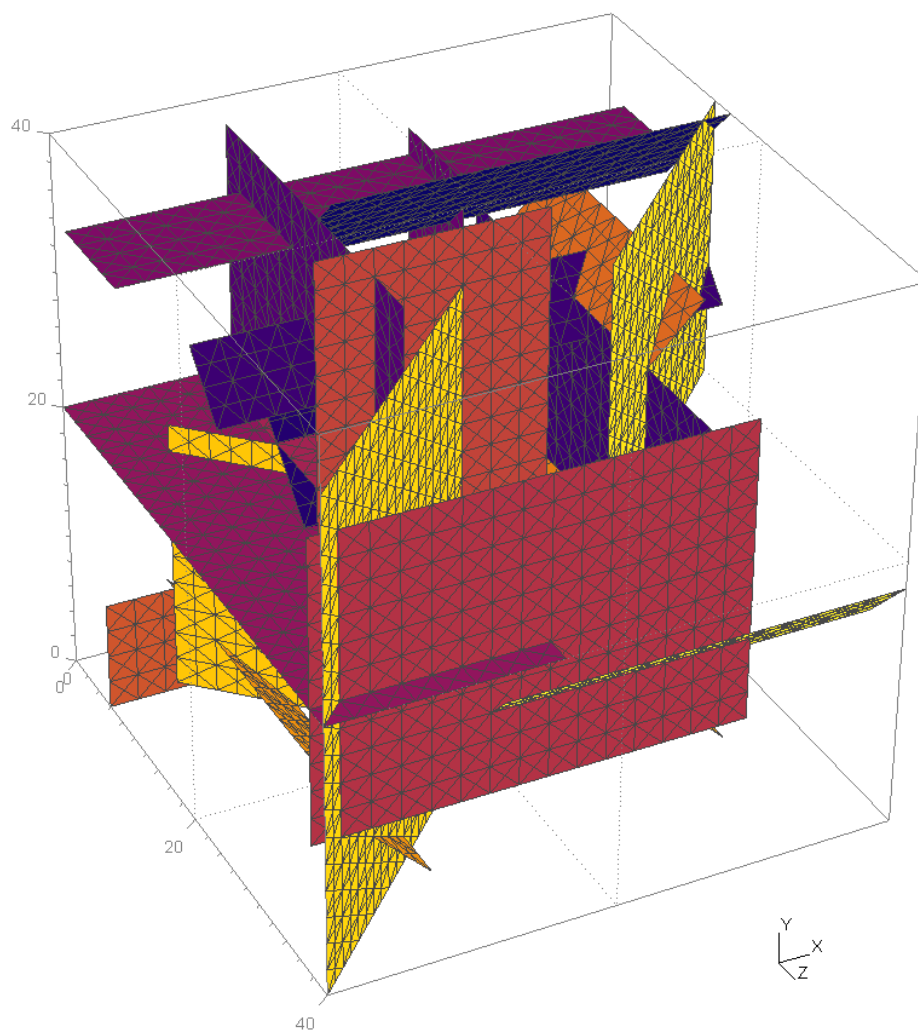
Obr. 3-6 Rozložená buňka z tetrahedronů



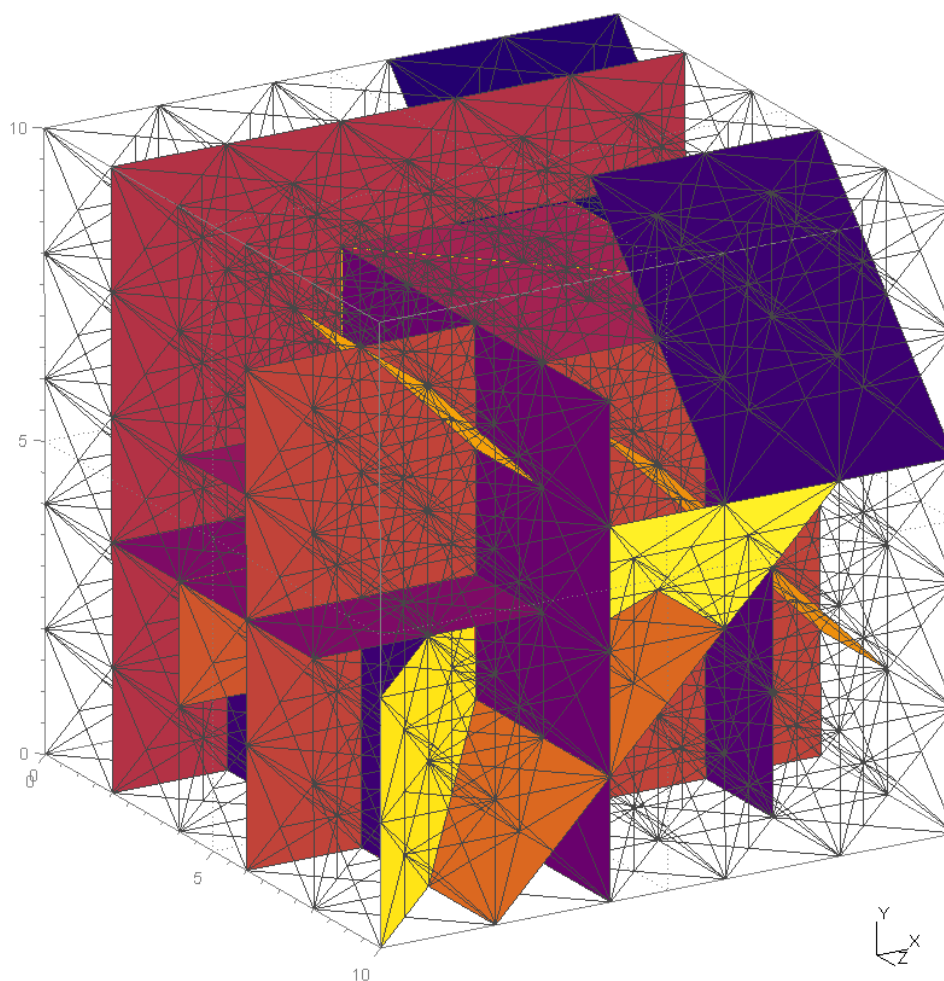
Obr. 3-7 Šestina buňky z různých pohledů

3.2 Ukázky generovaných sítí

Obr. 3-8 zobrazuje vygenerovanou puklinovou síť bez tetraedronů představujících porézní médium.



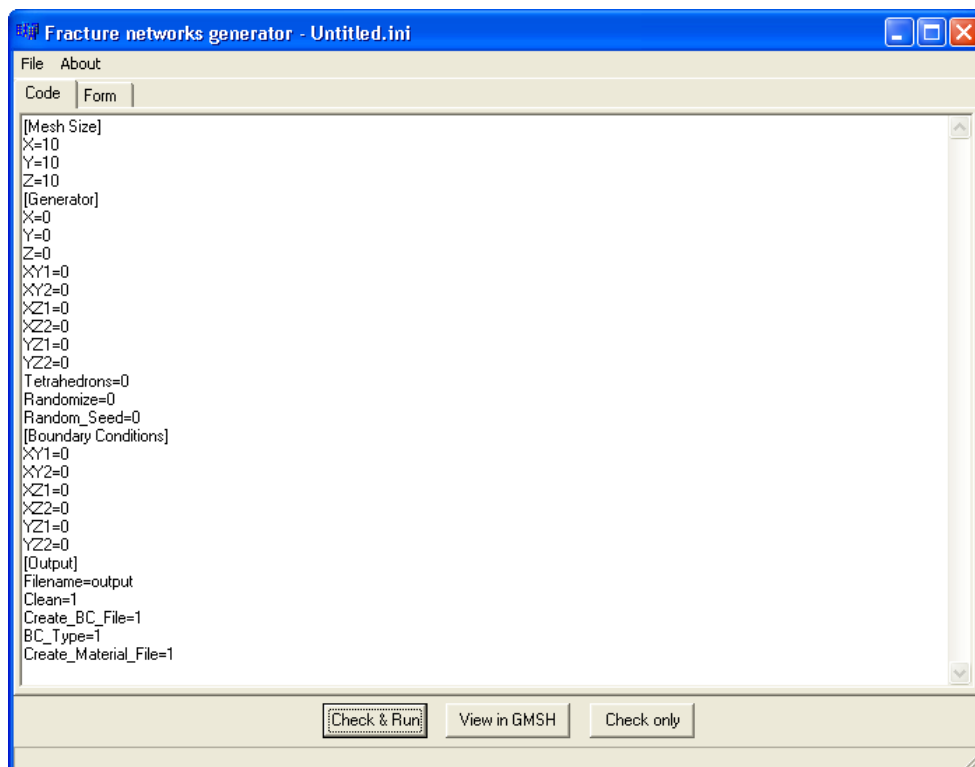
Obr. 3-8 Puklinová síť bez tetraedronů



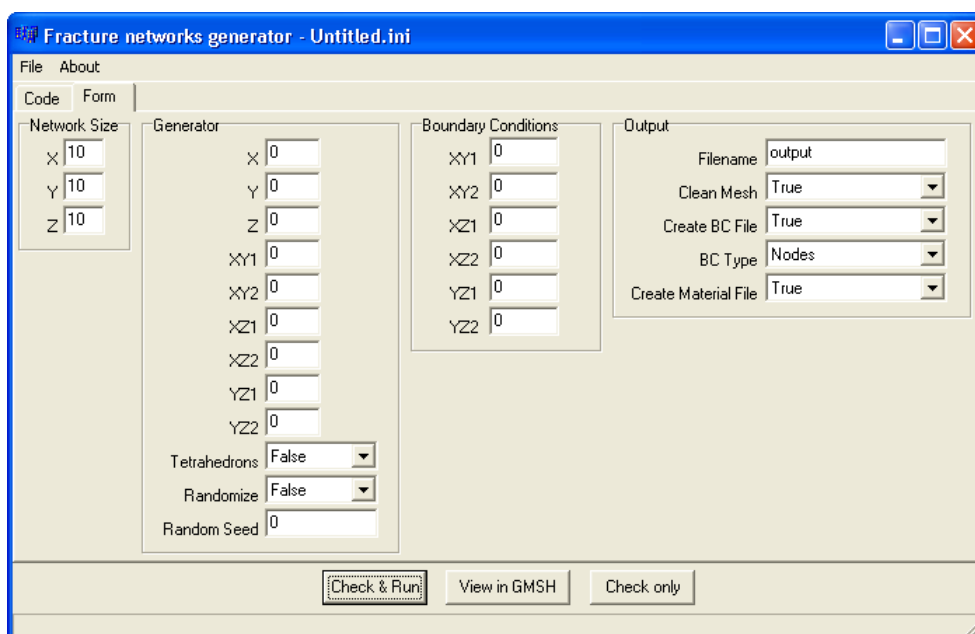
Obr. 3-9 Puklinová síť s tetrahedrony

3.3 Grafické rozhraní

Uživatelské prostředí grafické části programu (*GUI.exe*) nabízí dvě možnosti úpravy vstupního souboru. Přímou úpravu textového *INI* souboru (záložka *Code* – Obr. 3-10) nebo uživatelsky přívětivějším nastavením přes formulář (záložka *Form* – Obr. 3-11).



Obr. 3-10 Přímá úprava vstupního souboru



Obr. 3-11 Formulářová úprava vstupního souboru

Obě tyto formy lze libovolně kombinovat. Při přepnutí z jedné formy zadávání hodnot do druhé jsou vstupní hodnoty zkontrolovány, a pokud obsahují chybné údaje (nesprávný typ dat), je přepnutí znemožněno do doby, než jsou všechny chyby

opraveny. Stejná kontrola je prováděna před samotným spuštěním generátoru. Ten je možné spustit tlačítkem *Check & Run*. Následně vygenerovanou síť lze zobrazit tlačítkem *View in GMSH*. Podmínkou je program *gmsH.exe* umístěný ve stejné složce jako spouštěcí soubor grafického prostředí generátoru i generátor samotný. Tlačítkem *Check only* je provedena pouze kontrola vstupních hodnot. Dále je možné z programu přímo zakládat nové vstupní *ini* soubory, které se poté dají uložit a opětovně nahrát.

3.4 Výkonná část (generátor)

Jedná se o nejdůležitější část. Tento program vytvoří puklinové síť dle zadaných parametrů ve vstupním *ini* souboru.

Generátor (*generator.exe* případně *cmd.exe*) akceptuje tyto vstupní parametry (příkazová řádka):

1. **-i <vstupní ini soubor>**
2. **-quiet** (po ukončení nečekat na stisk klávesy)

3.5 Popis algoritmu generování

Generování vychází z předpokladu, že na začátku je známý rozměr oblasti. Je proto vygenerován konečný počet bodů v dané oblasti, na které se poté generátor může odkazovat. Tento způsob sebou nese i tu vlastnost, že některá identifikační čísla bodů vůbec nemusí ve finální puklinové síti figurovat.

V další fázi jsou vygenerovány samotné pukliny podle zadaných počtů, které jsou následně vysítovány. Dále je v celé oblasti vygenerováno porézní médium (pokud bylo nastaveno pro generování). Následně, pokud byla nastavena volba na promazání osamocených puklin (parametr *Clean*), jsou osamocené pukliny odebrány (tato možnost je automaticky vypnuta, pokud se generuje porézní médium – parametr *Tetrahedrons*). Nakonec jsou případně vygenerovány soubory s definicí materiálů a okrajových podmínek.

3.6 Použité datové struktury (výstupní formáty)

Jako výstupní formát generátoru je použit *msh* formát programu GMSH. GMSH je třídímenzionální generátor sítí používající pro generování sítí *Delaunayho triangulaci*. Umožňuje také pre- a post- processing úloh. Vyniká rychlostí i kvalitou generované sítě. Propracované má zatím pouze 1D a 2D algoritmy generování sítí a 3D algoritmus je zde zatím jako experimentální a je proto pomalý. Silnou stránkou program jsou možnosti zobrazení modelů (sítí).

Další výhoda spočívá v možnosti spustit program GMSH v grafickém režimu nebo s parametry z příkazové řádky. Je tedy jednoduché v podobě vstupního souboru definovat problém, program vstupní data zpracuje a výsledek uloží do jiného souboru. Bohužel tento program není přímo specializovaný na generování trojúhelníkových sítí u puklin, protože nepočítá s průsečnicemi puklin.

V následujících kapitolách 3.6.1, 3.6.2 a 3.6.3 jsou popsány použité datové formáty.

3.6.1 Soubor .msh

Výstupní soubor mesh s příponou *msh* programu GMSH má strukturu, která je standardní pro programy tohoto typu. V podstatě je soubor rozdělen na dvě části. První část, kde jsou definovány jednotlivé uzly (body), které se poté používají při definici úseček, trojúhelníků, čtyřstěnů a popřípadě dalších objektů. Ve druhé jsou definovány samotné elementy, v našem případě trojúhelníky. Soubor má tedy následující strukturu:

1. Hlavička *msh* souboru se skládá na prvním řádku z textu
\$MeshFormat
2. Druhý řádek obsahuje **verzi_souboru typ_souboru**
a **velikost_proměnné_double**
3. Po hlavičce se definují uzly, je proto potřeba definovat příslušnou sekci.
To provedeme pomocí zápisu **\$Nodes**
4. Na dalším řádku následuje **počet_definovaných_uzlů**

5. Definice jednotlivých uzlů o parametrech: **číslo_uzlu**
souřadnice_x souřadnice_y souřadnice_z
6. Část definice uzlů je zakončena **\$EndNodes**
7. Druhá část, tj. definice elementů, začíná zápisem **\$Elements**
8. Na dalším řádku následuje **počet_elementů**, který bude následovat
9. Definice elementů ve formě: **číslo_elementu typ_elementu**
(pro trojúhelník číslo 2) **číslo_fyzického_objektu**
číslo_základního_objektu počet_uzlů_elementu
a nakonec **seznam_uzlů**, ze kterých se element skládá
10. Definice elementů je zakončena na dalším řádku zápisem
\$EndElements

3.6.2 Soubor .mtr

Tento soubor obsahuje definice materiálů pro jednotlivé pukliny a porézní média. Struktura souboru je následující:

1. Soubor obsahuje hlavičku, ve které je na prvním řádku
\$MaterialFormat
2. Na druhém řádku hlavičky souboru je uvedena **verze_souboru**
typ_souboru a **velikost_proměnné_double**
3. Definice materiálů začíná řádkem **\$Materials**
4. Další řádek obsahuje **počet_definovaných_materiálů**
5. Poté následují jednotlivé definice materiálu ve formátu:
číslo_materiálu identifikátor_elementu
propustnost_elementu
6. Definice materiálů jsou zakončeny textem **\$EndMaterials**

3.6.3 Soubor .bcd

V tomto souboru jsou definovány okrajové podmínky pro jednotlivé elementy sítě (uzly, stěny puklin, stěny čtyřstěnů). Formát souboru má následující tvar.

1. Hlavička souboru obsahuje text **\$BoundaryFormat**
2. Na dalším řádku je uvedena **verzi_souboru typ_souboru a velikost_proměnné_double**
3. Hlavička je zakončena příkazem **\$EndBoundaryFormat**
4. Za hlavičkou následuje definice jednotlivých okrajových podmínek, tato část souboru je definována příkazem **\$BoundaryConditions**
5. Následuje řádek, kde je napsán **počet_okrajových_podmínek**
6. Na dalších řádcích jsou ve formátu: **číslo_okrajové_podmínky** uvedeny definice okrajových podmínek
7. Definice okrajových podmínek je zakončena příkazem **\$EndBoundaryConditions**

3.7 Vstupní soubor

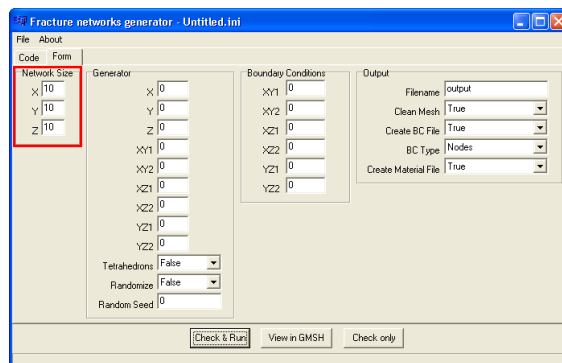
Pro vstupní soubor pro generátor je použit formát *INI* souboru. Soubor se dělí na 4 hlavní části:

1. Mesh Size
2. Generator
3. Boundary Conditions
4. Output

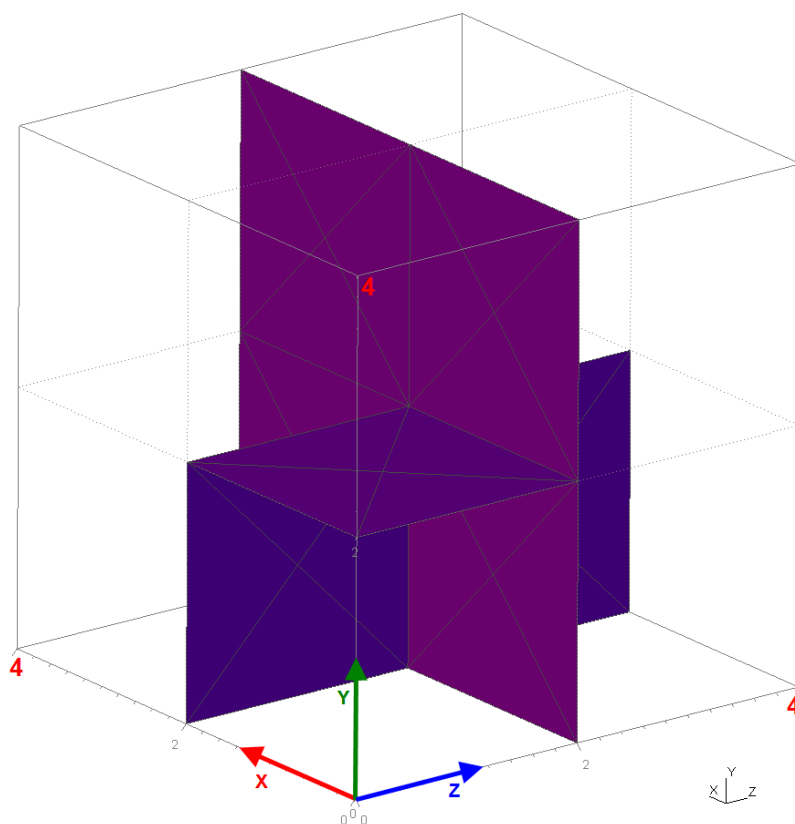
V první části se definuje velikost oblasti, na které se bude puklinová síť generovat. Ve druhé části se nastavuje počet puklin určitého typu, který se má generovat. Ve třetí části se definují okrajové podmínky. A v poslední čtvrté části se definují výstupní parametry generátoru.

3.7.1 Proměnné v Mesh Size

Jak již bylo zmíněno, v této části se definuje rozměr oblasti pro vytvoření generátorem. Obsahuje pouze 3 proměnné **X**, **Y**, **Z** (Obr. 3-12), které určují velikost generované sítě. Na Obr. 3-13 je zobrazena nejmenší možná síť vygenerovaná parametry **X=2**, **Y=2**, **Z=2**. Skutečná velikost je vždy dvakrát větší, kvůli různým typům generovaných puklin – **XY1**, **XY2**, **XZ1**, **XZ2**, **YZ1**, **YZ2** (kapitola 3.7.2).



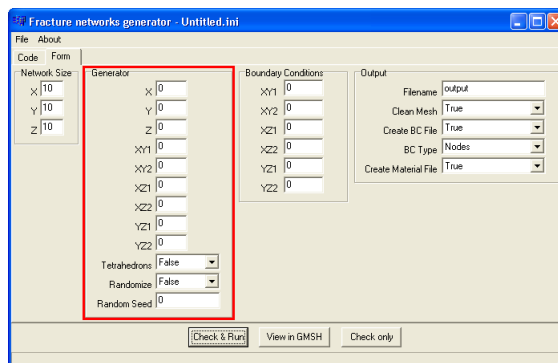
Obr. 3-12 Mesh Size hodnoty v grafickém prostředí



Obr. 3-13 Proměnné v Mesh Size

3.7.2 Generator

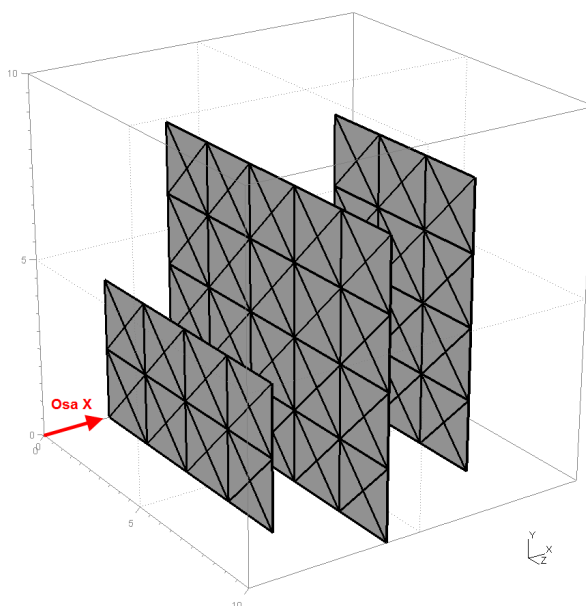
V této části vstupního souboru se určuje, kolik se bude generovat puklin. Tento počet se specifikuje pro každý typ pukliny zvlášť. Typem je myšlena rovina, ve které je puklina generována. Následovně lze zadat, zda se má generovat porézní médium a zda se má generovat náhodná síť.



Obr. 3-14 Oblast pro zadávání hodnoty pro generátor

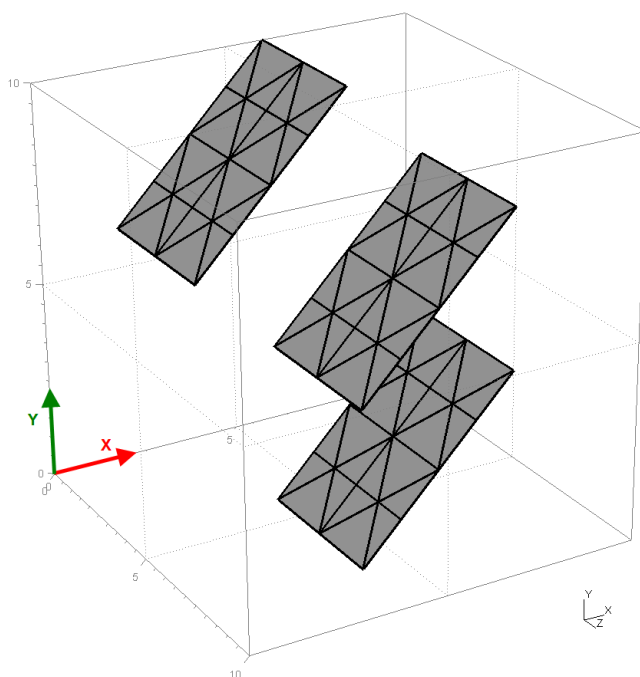
Tato část vstupního souboru obsahuje tyto proměnné:

- **X, Y, Z** – Celočíselná hodnota, určující počet generovaných puklin určitého typu. Pokud se např. jedná o typ X, tak u takové pukliny se nemění složka X u žádného z bodů, kterými je puklina definovaná (složka X je stejná pro všechny body pukliny viz Obr. 3-15)

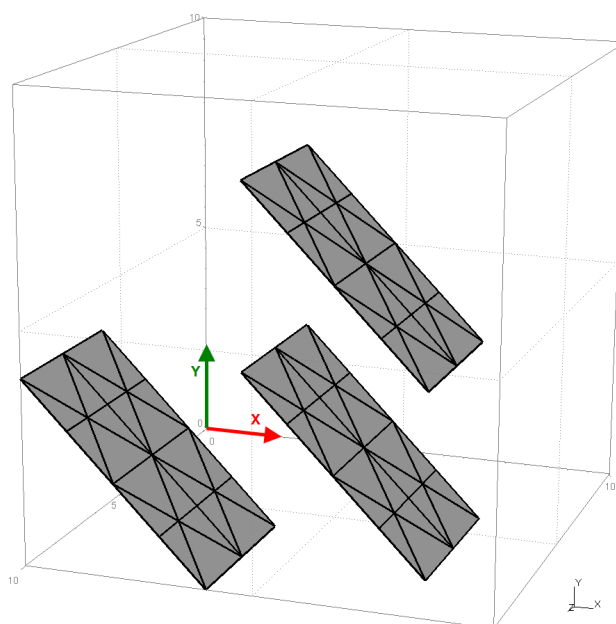


Obr. 3-15 Pukliny typu X

- **XY1, XY2, XZ1, XZ2, YZ1, YZ2** – Celočíselná hodnota, určující počet generovaných puklin určitého typu. Pukliny mají u každého bodu různé všechny 3 složky (XYZ). Leží v rovinách o 45° otočených oproti typům **X**, **Y** a **Z**. Stejné typy s rozdílným číslem jsou na sebe navzájem kolmé. Příklad těchto typů je vidět na Obr. 3-16 a Obr. 3-17.



Obr. 3-16 Pukliny typu XY1

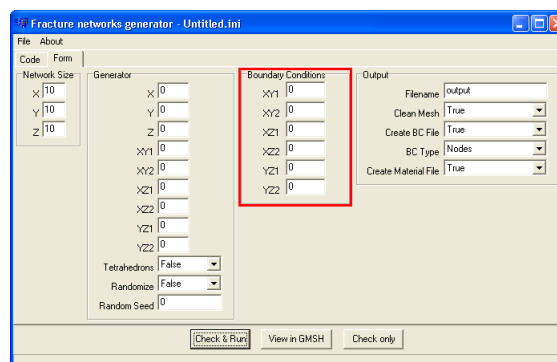


Obr. 3-17 Pukliny typu XY2

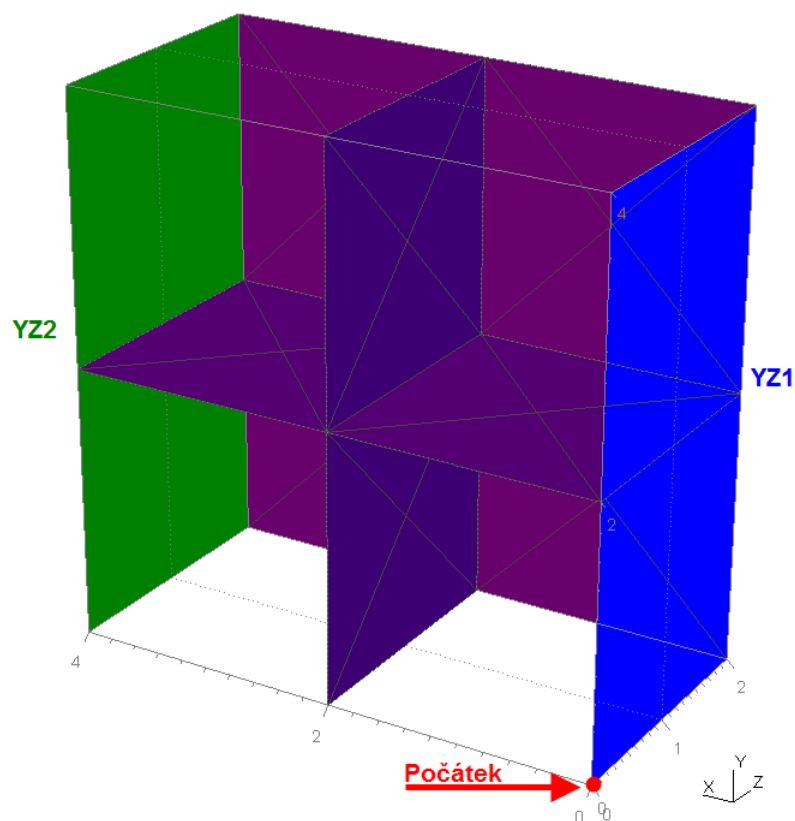
- **Tetrahedrons** – Možné hodnoty **0/1** (v grafické nadstavbě False/True). Tato proměnná určuje, zda se mají v celé oblasti generovat čtyřstěny (porézní médium).
- **Randomize** – Možné hodnoty **0/1** (v grafické nadstavbě False/True). Určuje, zda má být generování puklinové sítě zcela náhodné. Pokud má tato proměnná hodnotu 1, je proměnná *Random_Seed* ignorována. Při generování *msh* souboru je na konec souboru připsán *Random_Seed*, který se může použít pro vygenerování stejné sítě se stejnými vstupními parametry.
- **Random_Seed** – Možné celočíselné hodnoty **0–2147483647**. Při použití většího čísla je generována síť stejná jako při použití hodnoty 0. Jedná se o číslo, které se použije pro inicializaci generátoru pseudonáhodných čísel.

3.7.3 Boundary Conditions

V této části vstupního souboru se definují okrajové podmínky puklinové sítě. Lze v ní definovat tyto proměnné: **XY1**, **XY2**, **XZ1**, **XZ2**, **YZ1**, **YZ2**. Okrajové podmínky, které mají v názvu jedničku, leží v dané rovině blíže počátku [0,0,0].

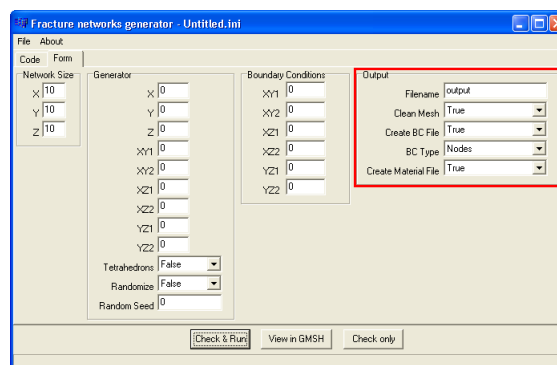


Obr. 3-18 Oblast okrajových podmínek v grafickém prostředí



Obr. 3-19 Definice okrajových podmínek

3.7.4 Output



Obr. 3-20 Oblast pro zadávání výstupních parametrů

Tato část souboru definuje, formu výstupu z generátoru. Obsahuje tyto volby:

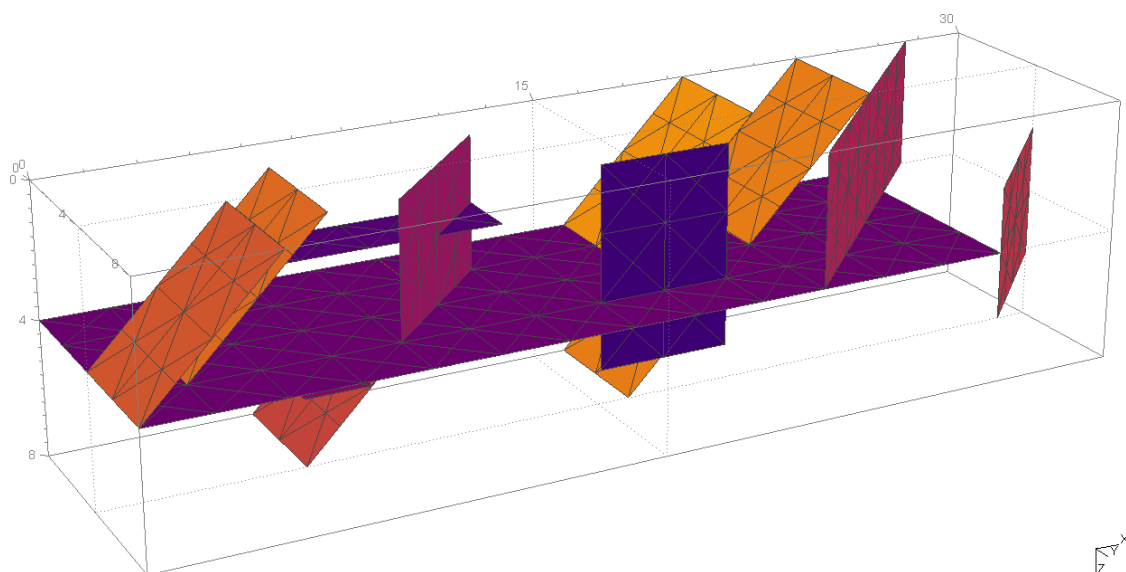
- **Filename** – Určuje název výstupních souborů. Přípona všem výstupním souborům je automaticky přidána. Proto je zde pouze název např.: output

- **Clean** – Možné hodnoty **0/1** (v grafické nadstavbě False/True). Tato volba určuje, zda se má síť „vyčistit“ od osamocených puklin (puklin, které nemají s žádnou jinou puklinou společné body). Pokud je zapnuto generování porézního média (viz parametr Tetrahedrons kapitola 3.7.2), je tato volba automaticky nastavena na hodnotu **0** (vypnuto)
- **Create_BC_File** – Hodnoty **0/1** (v grafické nadstavbě False/True) určují, zda se má vytvářet soubor s okrajovými podmínkami. Pokud je nastavena volba 1, vytvoří se soubor s příponou *bcd*.
- **BC_Type** – Možné volby jsou **1,2** (v grafické nadstavbě Nodes/Sides and Faces). Určuje, o jaký typ okrajových podmínek se jedná. Podle toho se vytvoří soubor s okrajovými podmínkami. Při volbě 1 se vytvářejí okrajové podmínky pro jednotlivé uzly. Volba 2 definuje okrajové podmínky na strany puklin a stěny tetrahedronů (porézního média).
- **Create_Material_File** – Možné volby jsou **0/1** (v grafické nadstavbě False/True). Tato položka určuje, zda se má vytvářet výchozí soubor s definicemi materiálů. Je vytvořen soubor s příponou *mtr*, který je poté nutné upravit pro stanovenou úlohu.

3.8 Ukázky výstupů za použití generátoru a Flow123D

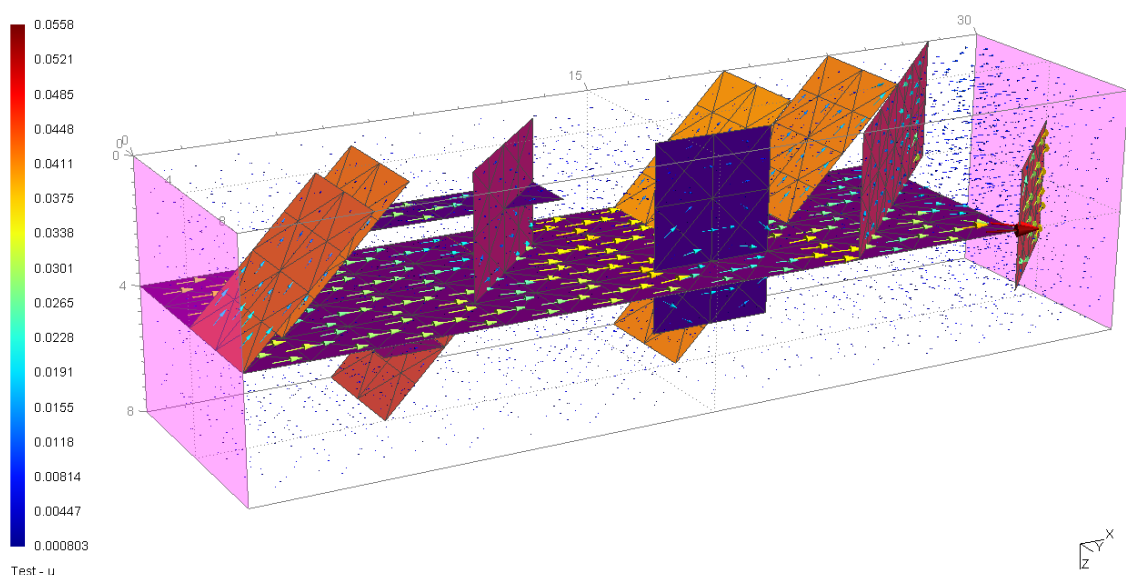
3.8.1 Okrajové podmínky na uzlech

Na následujícím obrázku (Obr. 3-21) je ukázka jedné ze sítí, na které byla vyzkoušena správná funkčnost generátoru puklin. Okolo pukliny se nachází porézní médium z tetrahedronů, které je pro přehlednost skryto. Okrajové podmínky (OKP) jsou v tomto případě definovány na uzlech.



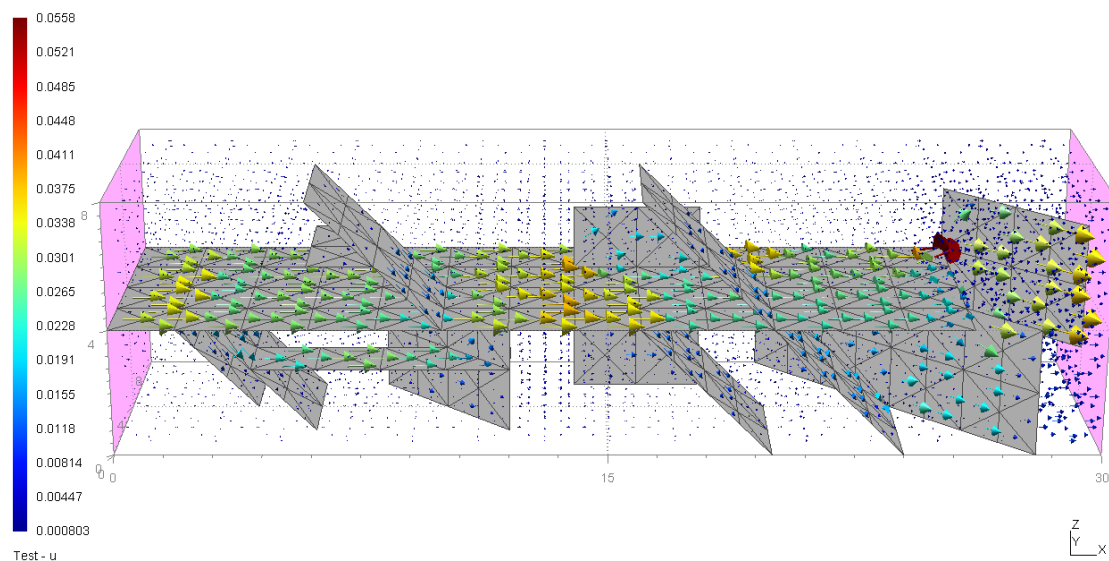
Obr. 3-21 Puklinová síť (OKP uzly)

Na dalším obrázku (Obr. 3-22) je vidět výsledek výpočtu z programu Flow123D s použitím primární formulace, který zobrazuje rychlost proudící kapaliny v prostředí. Na uzlech, fialově zvýrazněných stěn puklinové sítě, byly pomocí vytvořeného generátoru puklinových sítí nastaveny Dirichletovy okrajové podmínky. Koeficient přestupu u porézního média byl nastaven řádově menší, než u puklin. Proto většina kapaliny teče právě přes pukliny.



Obr. 3-22 Model proudění v puklinové síti (OKP uzly)

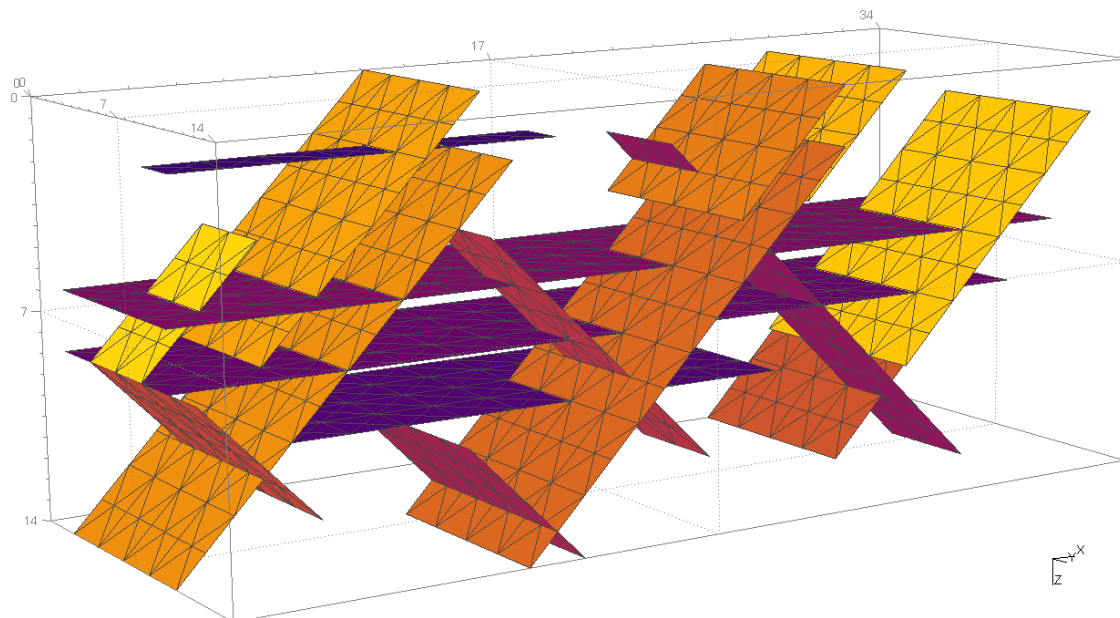
Následující obrázek (Obr. 3-23) poskytuje jiný úhel pohledu na tutéž síť.



Obr. 3-23 Jiný pohled na model (OKP uzly)

3.8.2 Okrajové podmínky na stěnách

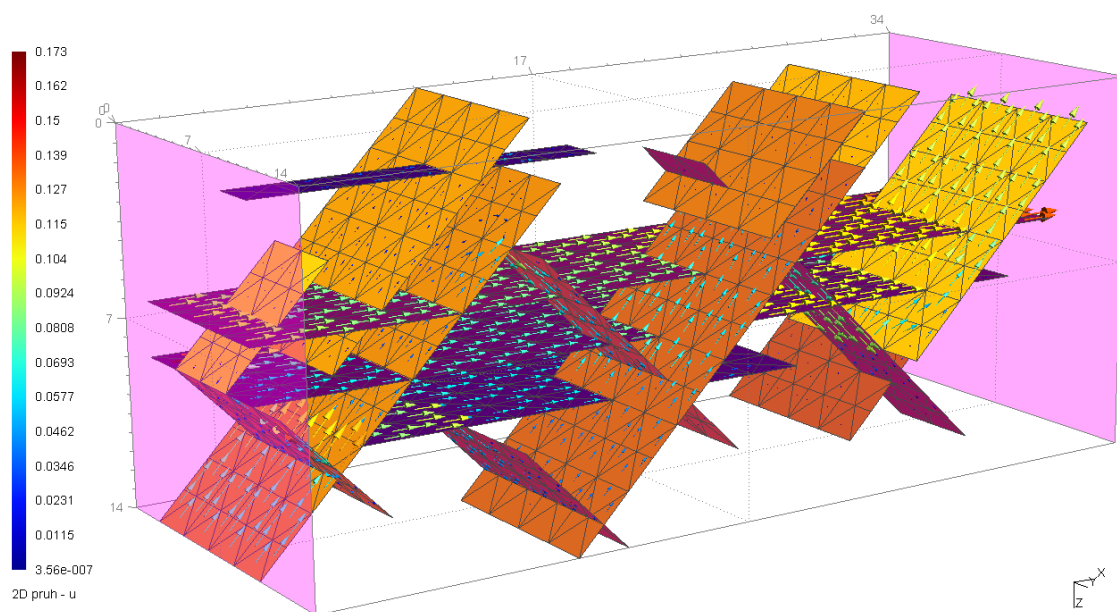
Na Obr. 3-24 je zobrazena generátorem vytvořená puklinová síť s porézním médiem, které je pro přehlednost skryto.



Obr. 3-24 Puklinová síť (OKP stěny)

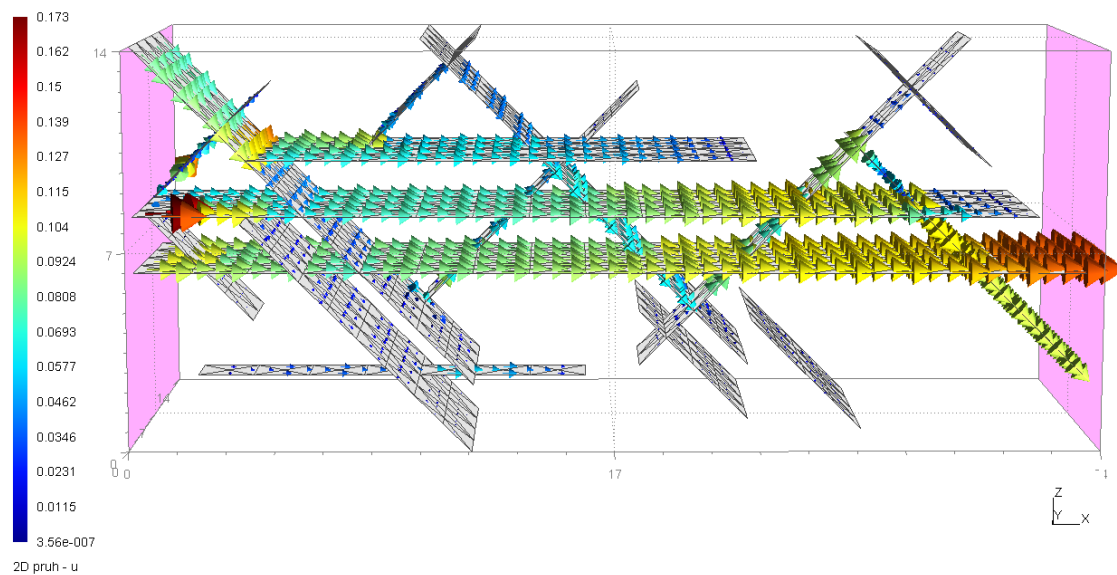
Model má zadané Dirichletovy okrajové podmínky na stěny tetrahedronů a strany puklin (v generátoru jako typ 2), které sousedí s fialově zvýrazněnými stěnami (Obr. 3-25). Porézní médium v modelu má nastavenou velmi malou propustnost, proto

je téměř všechnen tok veden přes pukliny (na obrázku tok porézním médiem není vidět, protože je velmi malý).



Obr. 3-25 Model proudění v puklinové síti (OKP stěny)

Na dalším obrázku (Obr. 3-26) je vidět stejný model z jiného pohledu.



Obr. 3-26 Jiný pohled na model (OKP stěny)

4 Závěr

V rámci diplomové práce byly vytvořeny dva programy, generátor strukturovaných puklinových sítí a jeho grafická nadstavba. Generování sítí se provádí na základě vstupních parametrů, které se předávají generátoru v podobě *ini* souboru (kapitola 3.7). Grafická nadstavba slouží k jednoduššímu zadávání parametrů pro generátor. Uživatel v něm má k dispozici rozhraní, přes které zadá vstupní údaje. Podle těchto vstupních údajů generátor vytvoří příslušnou puklinovou síť. Další vlastností je tvorba souborů s definicí okrajových podmínek a materiálů pro jednotlivé pukliny a porézní média.

Generované strukturované puklinové sítě byly úspěšně testovány programem Flow123D. Díky tomuto generátoru lze velmi jednoduše vytvářet rozsáhlé sítě, na nichž lze testovat nově vyvíjené i stávající numerické metody v programu Flow123D.

Jako další možné rozšíření generátoru připadá v úvahu např. tvorba *geo* souboru (soubor obsahující podobu puklinové sítě pomocí geometrických útvarů). To by umožnilo použití vlastních algoritmů k případnému vysítování. Dále by bylo možné přidat algoritmus pro optimalizaci výsledné sítě. Např. zvětšením (spojením) elementů by se mohlo docílit celkového zjednodušení sítě a snížení počtu elementů (paměťových nároků pro počítač). Dalším vylepšením programu by mohla být definice transformační matice, která by umožnila upravovat výslednou síť.

Literatura

- [1] **MARYŠKA J., SEVERÝN O., TAUCHMAN M., TONDR D.:** Modelling of the groundwater flow in fractured rock – a new approach, In Proceedings of Algoritmy 2005 (K. Mikula, ed.), Slovak Technical University, Bratislava, pp.113-122
- [2] **VOHRALÍK M.:** Datové struktury puklinového prostředí. Výzkumný projekt, FJFI ČVUT, Praha, 1999
- [3] **VOHRALÍK M.:** Mixed-hybrid Model of the Fracture Flow. Diploma Thesis, FM TUL, Liberec, 2000
- [4] **VILČINSKÝ P.:** Algoritmy prostorové diskretizace oblastí pro účely tvorby sítí pro numerické modely. Bakalářská práce, FM TUL, Liberec, 2003
- [5] **Cetin N.:** Diploma Thesis, [online] [cit. 16. 4. 2008]
URL: <<http://www.inf.ethz.ch/personal/cetin/thesis/thesis/node21.html>>
- [6] **SKIENA S. S.:** The Algorithm Design Manual. [online] [cit. 16. 4. 2008]
URL: <<http://www2.toki.or.id/book/AlgDesignManual/BOOK/BOOK4/NODE183.HTM>>
- [7] Dokumentace a zdrojové kódy programu Flow123D. FM TUL, Liberec, 2005–2008.
- [8] **GEUZAIN C., REMACLE J.-F.:** Dokumentace k programu GMSH, [online] [cit. 7.5.2008] URL: <<http://www.geuz.org/gmsh/>>. 1997–2008.
- [9] **OWEN S.:** Obrázek z internetové stránky [online] [cit. 7. 5. 2008]
URL: <<http://www.andrew.cmu.edu/user/sowen/riemann/riemann.html>>